

УДК 543.427.4

ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДЛЯ РЕНТГЕНОФЛУОРЕСЦЕНТНЫХ АНАЛИЗАТОРОВ

А.А.Пулин

Уральский государственный технический университет-УПИ, НИЛ электроники
рентгеновских приборов
620002, Екатеринбург, Мира, 19
lelik@dpt.ustu.ru

Поступила в редакцию 8 сентября 2002 г.

В статье проведен краткий обзор интерфейсов, используемых для связи рентгенофлуоресцентных анализаторов с персональным компьютером, рассмотрена структура программного обеспечения для обработки спектров рентгеновской флуоресценции и проведения количественного анализа.

В настоящее время программное обеспечение (ПО) является неотъемлемой частью современных рентгенофлуоресцентных анализаторов. Специализированное ПО зачастую определяется областью применения анализатора и разрабатывается непосредственно для конкретной задачи. при этом аппаратная часть анализатора может оставаться неизменной.

Программное обеспечение для рентгенофлуоресцентных анализаторов выполняет следующие функции:

- контроль за работой процессора спектрометрических импульсов (спектрометра), обеспечение и управление обменом спектрометра с компьютером;
- накопление спектрометрической информации;
- обработку спектров рентгеновской флуоресценции.

В последние годы большое распространение получил обмен через параллельный (LPT) порт, что позволяет передавать без потерь спектрометрическую информацию при загрузках анализатора до 40 кГц (стандартный режим – SPP mode). Полубайтный режим, организующий чтение для

Пулин Алексей Александрович – аспирант кафедры экспериментальной физики Уральского государственного технического университета – УПИ.

Область научных интересов: взаимодействие рентгеновского излучения с веществом, энергодисперсионный рентгенофлуоресцентный анализ.

Автор 9 публикаций.

стандартного параллельного порта. долгое время использовался для связи со спектрометром на ППД. Существенным препятствием для применения данного интерфейса в настоящее время становится отсутствие LPT-порта в со-

временных портативных персональных компьютерах и возможности двунаправленного обмена. Одной из альтернатив существующим интерфейсам спектрометров является расширенный параллельный порт (EPP). В отличие от предыдущего параллельного интерфейса EPP позволяет организовывать двунаправленный прием/передачу.

Использование же COM-порта без дополнительной инкрементной памяти вообще не представляется возможным. С учётом всех характеристик интерфейса, ориентированного на COM-порт, очевидно, что использование его в новых разработках наименее предпочтительно. Однако COM-порт хорош тем, что, достаточно легко производя трансляцию из RS-232 в RS-485 можно увеличить максимальную длину кабельной системы до 1300 метров.

Одним из перспективных интерфейсов на сегодняшний день, с точки зрения применимости в современных компьютерах, быстродействия и

удобства пользователя, является организация обмена по шине USB. Пропускная способность USB сравнима с производительностью LPT-порта в EPP режиме (здесь имеется в виду USB 1.1, производительность USB 2.0 на порядок выше). Хост-контроллер USB интегрирован в большинство современных системных плат персональных компьютеров и практически во все современные ноутбуки. Это позволяет существенно улучшить компактность портативного спектрометра. Наличие «горячего» подключения (подключение без выключения питания с автоматической загрузкой драйверов и возможность управления питанием как спектрометра, так и компьютера) добавляет ин-

терфейсу качественно новые свойства. Скрытие операционной системой доступа к хост-контроллеру имеет целью написание драйвера устройства в соответствии с моделью драйверов Windows (WDM), что соответствует общей идеологии многозадачной операционной системы. По сравнению с программной организацией обмена на LPT- и COM-портах, эта особенность USB значительно усложняет этап программирования, хотя ситуация несколько упрощается наличием поддержки создания драйверов в Windows Device Driver Kit (DDK), представляющих комплекс программных средств, документации и примеров, предоставляемых Microsoft (см. таблицу).

Сравнительная характеристика интерфейсов [1]

Интерфейс	LPT-порт, режим NIBBLE	LPT-порт, режим EPP	COM-порт	USB1.1
Максимальная пропускная способность	50 Кбайт/с	500 Кбайт - 2 Мбайт/с	112,5 Кбит/с	1,5-12 Мбит/с (до 1,2 Мбайт/с)
Время обслуживания запроса ПУ	≤ 10мкс	≤ 10мкс	10мкс-10мс (в зависимости от скорости работы)	≤ 1мс (для некоторых типов передач)
Максимальное количество устройств	1	1	1	127
Поддержка PnP	Нет	Нет	Нет	Полная
Максимальная длина кабеля, м	≤ 4	≤ 4	≥ 1,5	≤ 5
Управление энергопотреблением	Нет	Нет	Нет	Есть
Программирование	На уровне управления битами портов ввода/вывода	На уровне обращения к портам ввода/вывода	На уровне обращения к портам ввода/вывода	На уровне обращений к «нижележащим» драйверам ОС

Передача кода амплитуд импульсов от спектрометра к компьютеру продолжается до истечения времени экспозиции, задаваемой по одному из «времен» (календарному или «живому»), либо по числу набранных в заданном диапазоне энергий (амплитуд) событий («интеграл»). Аппаратная часть спектрометра включает в себя корректор «мертвого» времени, который позволяет корректно учесть все составляющие «мертвого» времени, включая и время обмена между спектрометром и компьютером. Поэтому представляется возможным задавать экспозицию измерения по «живому» времени.

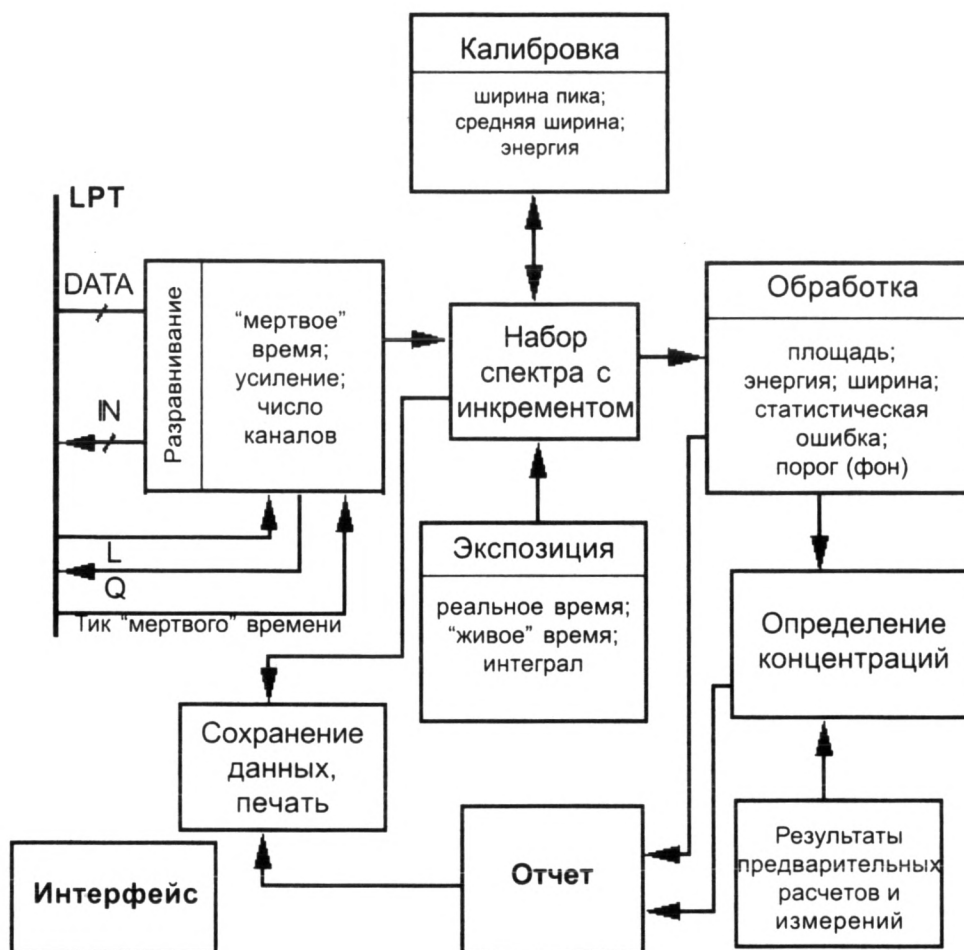
Наблюдение за набором спектра в инкрементном режиме возможно непосредственно на экране монитора компьютера «on-line». Несомненным преимуществом программного обеспечения явля-

ется возможность проводить обработку и анализ исследуемых спектров рентгеновской флуоресценции непосредственно во время накопления информации.

Под обработкой спектра подразумевается поиск и определение параметров аналитических пиков: энергии, идентификации линии, ширины пика на полувысоте – полуширина (энергетическое разрешение), площади пика, площади фона под пиком (в интеграле), статистической ошибки определения площади пика. Существует возможность определения пиков, разность энергий которых меньше энергетического разрешения спектрометра, - «скрытых» пиков. Площадь пика определяется за вычетом фона, и пик аппроксимируется гауссианом. Корректно определенная площадь, нормированная на живое вре-

мя – интенсивность, является основным параметром для определения концентрации идентифи-

цированного элемента (см. рисунок).



Структурная схема программы-анализатора с управлением спектрометром по LPT-порту

Кроме того, программа-анализатор обеспечивает:

- управление спектрометром и программой с клавиатуры компьютера, манипулятором "мышь" и с блока детектирования анализатора;
- набор спектра по реальному времени, по живому времени, по интегралу в заданной области или статистической ошибке пика в заданной области;
- наблюдение процесса набора спектра, обработка его на "лету" для оценки промежуточных результатов;
- параллельную с набором и наблюдением обработку спектров из файлов на диске в многооконном режиме;
- визуальную оценку результатов автоматической обработки спектров и вывод параметров спектра на печать и в файлы;
- ручную разметку спектра, выделение зон интереса в спектре, другие функции разметки;
- математические операции со спектрами,

сглаживание спектров, выделение сложного фона в диалоговом режиме;

- калибровку спектрометра по ширине аналитических пиков и по энергетической шкале, оценка нелинейности спектрометра;
- результаты обработки выводятся на экран монитора в процессе или по окончании измерений, возможен также вывод на печать сохраненного файла отчета и графика спектра в линейном или логарифмическом масштабах;
- загрузку и корректировку баз данных для автоматической расшифровки спектров, автоматическую расшифровку спектров;
- настройку программы и сохранение параметров настройки в дисковом файле;
- получение оперативной справочной информации во время работы программы;

Использование в программе оригинальных скоростных алгоритмов, позволяет вести обработку спектров в реальном масштабе времени и получать информацию о спектре практически мгновенно.

венно. Поэтому общепринятая схема «Набор спектра – Обработка – Просмотр результата» в данной программе заменена на просто «Просмотр результата». Заботу об обработке берет на себя сама программа.

Переход от измеренной интенсивности аналитической линии к содержанию определяемого элемента – завершающий этап анализа. В настоящее время используются три способа количественного анализа, в зависимости от поставленной задачи:

- регрессионный анализ, при котором взаимосвязь интенсивности и концентрации определяется на внешних стандартах и описывается функциональной зависимостью. В данном методе используются образцы сравнения, которые по составу, величине зерна, состоянию поверхности и структуре аналогичны анализируемым образцам и при калибровке и анализе служат эталонами для сравнения. Если исследуемый диапазон концентраций не очень велик и возможна пропорциональность между интенсивностью и концентрацией, то влияние матрицы исключается сравнением измеренных интенсивностей с интенсивностями стандартных образцов. При этом содержание определяемых элементов в образцах-стандартах должно быть известно с достаточной точностью, например с помощью химического анализа. С помощью семейств калибровочных или поправочных кривых, содержащих в качестве параметра мешающий элемент, эти влияния могут быть скорректированы в широких диапазонах концентраций. Вместе с тем применение данной методики требует большого числа стандартных образцов и поэтому ограничено определением некоторых элементов. Данный метод применяется в настоящее время для количественного анализа сплавов циркония на Чепецком механическом заводе (г. Глазов);

- модель корректировки по концентрации («б-коррекция») также используется для анализа образцов, достаточно близких по составу (группа сталей, группа латуней);

- способ фундаментальных параметров – для анализа образцов произвольного состава. Программа, использующая способ фундаментальных параметров, универсальна для расчетов интенсивностей рентгеновской флуоресценции на основе анализа измеренного спектра, расчетов содержания элементов, исходя из найденных интенсивностей аналитических линий для гомогенных образцов и различных сочетаний определяемых элементов и условий возбуждения рентгеновской флуоресценции. В качестве источников возбуждения

в основном используются: источник ^{241}Am (ИГИА-3), источник ^{239}Pu (ИРИПЛ-3), как отдельно, так и совместно с ^{241}Am , портативный рентгеновский излучатель (рентгеновская трубка).

Программа вычисляет поправки на матричные эффекты: поглощение первичного и вторичного излучения в образце, вторичную флуоресценцию, рассчитывается спектр излучения рентгеновской трубки.

В программе используются следующие фундаментальные параметры:

- массовые коэффициенты ослабления из таблиц Хайнриха [2];
- энергии аналитических линий элементов;
- энергии краев поглощения;
- выходы флуоресценции;
- скачки поглощения;
- вероятности испускания линий K-, L-, M-серий;

- атомные номера и массы элементов.

Для расчета условий возбуждения и спектрального распределения первичного излучения необходимы следующие данные:

- атомный номер элемента анода рентгеновской трубки;
- тип анода (прострельный или массивный);
- угол падения первичного излучения на пробу и угол отбора излучения от пробы (угол, под которым виден детектор);
- энергии характеристических линий анода и энергии краев поглощения;
- толщина окна рентгеновской трубки, его материал и плотность;
- ускоряющий потенциал.

Число одновременно определяемых элементов в исследуемом образце – не более 20.

Диапазон определяемых элементов – от кальция ($Z=20$) до урана ($Z=92$).

Время анализа (экспозиция) задается оператором до начала измерения, может быть изменена оператором в процессе измерения или изменена автоматически в зависимости от загрузки спектрометра по входу, что определяется Z матрицы исследуемой пробы. Верхний предел времени анализа не ограничен, нижний – не менее 3 с.

Программы для РФ-анализа написаны в среде Borland Pascal 7.0 для MS-DOS и в Borland Delphi 5.0, Microsoft Visual C++ 6.0 для Windows.

Немаловажную роль играет простота и удобство пользовательского интерфейса. С данной точки зрения среда Windows более предпочтительна по сравнению с MS-DOS. Проблемы возникают при программировании обмена компьютера со спектрометром из-под Windows в режиме

«true time» (реального времени). Для того чтобы избежать потерь информации при передаче данных, необходим драйвер внешнего устройства, управляющий обменом со спектрометром. Эта задача была решена как для LPT-порта, так и для организации обмена по USB.

Сравнение программного обеспечения для MS-DOS («чистый» DOS, а не «Command prompt») и для Windows показало, что различие в скоростях счета менее 0,3 %, причем в пользу Windows. В то же время для DOSовской программы, работающей из-под Windows, потери информации достигают 15 %. Тем не менее работа в Windows в режиме «true time» при временах обмена менее 1 мкс достаточно проблематична. В настоящее время используется программное обеспечение для MS-DOS и для Windows 95/98/Me.

Из известного автору программного обеспечения для энергодисперсионных рентгенофлуоресцентных анализаторов внимания заслуживает программный продукт, созданный АОЗТ «Южпо-

лиметалл-холдинг» (г. Москва). Программа накопления и обработки спектрометрической информации создана для ОС Windows, а количественный анализ проводится способом фундаментальных параметров. Большую работу в этом направлении проводит также Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики и автоматизации (ВНИИТФА).

В.Я. Борходоев в своей монографии [3] большое внимание уделяет программному обеспечению при количественном анализе способом фундаментальных параметров, а также дает подробный обзор литературы, посвященной данной области. Но в этой литературе «...основное внимание обращено на содержательную сторону программ и в меньшей степени - на среду, в которой они реализованы» [3, с. 155]. С этой точки зрения существует большое поле деятельности для реализации алгоритмов в современных языках высокого уровня и адаптации ПО под быстродействующие персональные компьютеры.

ЛИТЕРАТУРА

1. Гук М. Аппаратные средства IBM PC: Энциклопедия. 2-е изд. СПб.: Питер, 2001. 928 с.
2. Heinrich K.F.J. X-ray absorption uncertainty // The Electron Microprobe. N.Y.: Wiley, 1966. P. 296 – 377.
3. Борходоев В.Я. Рентгенофлуоресцентный анализ горных пород способом фундаментальных параметров. Магадан: СВКНИИ ДВО РАН, 1999. 279 с.

* * * * *

SOFTWARE FOR X-RAY FLUORESCENCE ANALYZERS
A.A.Pulin

Review of interfaces for connection x-ray fluorescence analyzers with PC, software structure for identification of x-ray fluorescence spectra and quantitative analysis represented in this article.
